

量子電磁力学におけるハイゼンベルク演算子の時間発展と 波動関数の時間発展

(京大院工) 市川 和秀, 福田 将大, 立花 明知

Time evolution of Heisenberg operators and wave function in quantum electrodynamics

(Kyoto University) Kazuhide Ichikawa, Masahiro Fukuda, Akitomo Tachibana

量子電磁力学 (Quantum ElectroDynamics; QED) は光子と荷電粒子の相互作用を記述する場の量子論である。場の量子論の解法としては従来から共変摂動論による方法が部分的に成功をおさめているが、系の時間発展を QED に基づいて第一原理的に時々刻々と追跡することには適用できず、非摂動的な方法の開発が必要である。また、質点系の量子力学のように波動関数の時間発展を計算するだけでは不十分で、場の演算子 (ハイゼンベルク演算子) の時間発展を合わせて計算する必要がある。われわれは QED におけるマクスウェル場とディラック場の量子場の方程式を正準量子化のもとで数値的に解く方法を研究しているが [1-5]、その定式化と数値計算コードの現状について報告する。

QED では電子と陽電子は 4 成分ディラック場演算子 $\hat{\psi}(ct, \vec{r})$ 、光子はゲージ対称性を持つベクトル場演算子 $\hat{A}(ct, \vec{r})$ で表される。以下、時空座標を $x = (ct, \vec{r})$ と表す。われわれはクーロンゲージ $\vec{\nabla} \cdot \hat{A}(x) = 0$ を用いる。それぞれが従う量子場の運動方程式はディラック方程式 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(x) = \left\{ -i\hbar c \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - (Z_e e) \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \hat{A}(x) + m_e c^2 \gamma^0 + (Z_e e) \hat{A}_0(x) \right\} \hat{\psi}(x)$ とマクスウェル方程式 $-\nabla^2 \hat{A}_0(x) = 4\pi \hat{\rho}_e(x)$ 、 $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \hat{A}_0(x) + \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \hat{A}(x) = \frac{4\pi}{c} \hat{j}_e(x)$ である。ここで電子電荷密度演算子 $\hat{\rho}_e(x) = Z_e e \hat{\psi}(x) \gamma^0 \hat{\psi}(x)$ および電子電流密度演算子 $\hat{j}_e(x) = Z_e e c \hat{\psi}(x) \vec{\gamma} \hat{\psi}(x)$ で、 $Z_e = -1$ である。電磁気学の単位系はガウス単位系を用いる。 \hbar は換算プランク定数、 c は真空中の光速を表す。 e は電子電荷の大きさ (すなわち e は正)、 m_e は電子質量を表す。 γ^μ はガンマ行列である。場の演算子は次のような同時刻 (反) 交換関係 $\left\{ \hat{\psi}_\alpha(ct, \vec{r}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(ct, \vec{s}) \right\} = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{s}) \delta_{\alpha\beta}$ および $\frac{1}{4\pi c} \left[\hat{A}^i(ct, \vec{x}), \hat{E}_T^j(ct, \vec{y}) \right] = i\hbar \eta^{ij} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) + i\hbar \partial_x^i \partial_y^j \left(-\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|} \right)$ にしたがう (他の (反) 交換関係はゼロ)。ここで、電場横成分は $\hat{E}_T(x) = -\frac{1}{c} \dot{\hat{A}}(x) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \hat{A}(x)}{\partial t}$ である。

物理量演算子 (例えば上で挙げた $\hat{\rho}_e(x)$ や $\hat{j}_e(x)$) は $\hat{\psi}(x)$ と $\hat{A}(x)$ で表され、それらの時々刻々の時間発展を計算したいが、従来からある摂動論では $t \rightarrow \pm\infty$ で相互作用が無い理論 (漸近場) を想定して無限の過去と無限の未来の差を計算するもので、われわれの目的には適さない。われわれは初期時刻 $t = t_0$ を想定し、 $t \geq t_0$ の全ての時刻にわたって場は相互作用していると考え、 $t < t_0$ では場は存在しないという境界条件を用いることにする。以下ではこの境界条件とマクスウェル方程式を用いて光子場を積分形で表すことにするが、このほうが数値計算上便利である。具体的な形は、 $\hat{A}(ct, \vec{r}) = \hat{A}_{\text{rad}}(ct, \vec{r}) + \hat{A}_A(ct, \vec{r})$ のように自由輻射場と遅延ポテンシャル項に分

けられ、それぞれ

$$\begin{aligned}\hat{A}_{\text{rad}}^k(\vec{r}) &= \frac{\sqrt{4\pi\hbar^2c}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[\hat{a}_{\vec{p},\sigma} e^k(\vec{p},\sigma) e^{-icp^0t/\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} + \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger e^{*k}(\vec{p},\sigma) e^{icp^0t/\hbar} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \right] \\ \hat{A}_A(ct, \vec{r}) &= \frac{1}{c^2\pi} \int_{t_0}^t du' \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \int d^3\vec{s} \hat{j}_T(cu', \vec{s}) \exp\left(i\alpha \left((u' - t)^2 - \frac{(\vec{r} - \vec{s})^2}{c^2} \right)\right)\end{aligned}\quad (1)$$

と表される。ここで、 $\hat{a}_{\vec{p},\sigma}$ は光子の消滅演算子、 \vec{p} は光子運動量、 σ は左右の円偏光を表し、 e^k は偏光ベクトル、 \hat{j}_T は電流演算子の横成分 ($\text{div} \hat{j}_T(\vec{r}) = 0$) である。これをディラック場の方程式に代入して演算子の時間発展を求めるが、それに際して時空の変数を時間と空間に分離するためにディラック場を $\hat{\psi}(ct, \vec{r}) = \sum_{n=1}^{N_D} \sum_{a=\pm} \hat{e}_{n^a}(t) \psi_{n^a}(\vec{r})$ と完全系で展開して電子の消滅演算子 $\hat{e}_{n^+}(t)$ と陽電子の生成演算子 $\hat{e}_{n^-}(t)$ を定義する。このとき場の演算子の反交換関係は $\{\hat{e}_{m^b}(t), \hat{e}_{n^a}^\dagger(t)\} = \delta_{mn} \delta_{ab}$ を意味することになる。簡単のため $\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}(t) \equiv \hat{e}_{p^c}^\dagger(t) \hat{e}_{q^d}(t)$ という記法を導入すると、ディラック場の運動方程式は

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d\hat{e}_{n^a}}{dt}(t) &= \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} (T_{n^a m^b} + M_{n^a m^b}) \hat{e}_{m^b}(t) + \sum_{m,p,q=1}^{N_D} \sum_{b,c,d=\pm} (n^a m^b | p^c q^d) \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}(t) \hat{e}_{m^b}(t) \\ &- \frac{1}{c^3\pi} \sum_{m,p,q=1}^{N_D} \sum_{b,c,d=\pm} \int_{t_0}^t du' \left\{ K_{jj,n^a m^b p^c q^d}(t - u') \hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}(u') + K_{jE,n^a m^b p^c q^d}(t - u') \frac{d\hat{\mathcal{E}}_{p^c q^d}}{dt}(u') \right\} \hat{e}_{m^b}(t) \\ &- \sqrt{\frac{1}{2\pi^2\hbar c}} \sum_{m=1}^{N_D} \sum_{b=\pm} \sum_{\sigma=\pm 1} \int \frac{d^3\vec{p}}{\sqrt{2p^0}} \left[\mathcal{F}_{n^a m^b \vec{p},\sigma}(t) \hat{a}_{\vec{p},\sigma} + \mathcal{F}_{m^b n^a \vec{p},\sigma}^*(t) \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] \hat{e}_{m^b}(t),\end{aligned}\quad (2)$$

となる。微分方程式の係数は展開関数の組み合わせの空間積分で表されるが、詳細な定義は [5] や講演要旨 4P088 を参照されたい。本発表では、この演算子を行列表現して数値的に解く方法を議論し、QED のハミルトニアン演算子 $\hat{H}_{\text{QED}} = \int d^3\vec{r} : \hat{H}_{\text{QED}}(x) :$ を数値的にもとめる方法を議論する。ここで、 $::$ は c 数の無限大を無視するという正規積を表し、ハミルトニアン密度演算子は、

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{QED}}(x) &= \frac{1}{8\pi} \hat{E}_T^2(x) + \frac{1}{8\pi} (\vec{\nabla} \times \hat{A}(x))^2 - \frac{1}{c} \hat{j}_e(x) \cdot \hat{A}(x) + \frac{1}{2c} \hat{j}_{e0}(x) \hat{A}_0(x) \\ &- i\hbar c \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^k \partial_k \hat{\psi}(x) + m_e c^2 \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \hat{\psi}(x)\end{aligned}\quad (3)$$

である。

参考文献

- [1] A. Tachibana, Field Energy Density In Chemical Reaction Systems. In *Fundamental World of Quantum Chemistry, A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin*, E. J. Brändas and E. S. Kryachko Eds., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2003), Vol. II, pp 211-239.
- [2] A. Tachibana, Electronic Stress with Spin Vorticity. In *Concepts and Methods in Modern Theoretical Chemistry*, S. K. Ghosh and P. K. Chattaraj Eds., CRC Press, Florida (2013), pp 235-251
- [3] A. Tachibana, J. Math. Chem. *published online* (2015) DOI 10.1007/s10910-015-0528-0
- [4] *QEDynamics*, M. Senami, K. Ichikawa and A. Tachibana
<http://www.tachibana.kues.kyoto-u.ac.jp/qed/index.html>
- [5] K. Ichikawa, M. Fukuda and A. Tachibana, Int. J. Quant. Chem. **113**, 190 (2013); **114**, 1567 (2014).